

# 関谷 博 (せきや ひろし)

九州大学大学院理学研究院 教授



【E-mail】 [sekiya@chem.kyushu-univ.jp](mailto:sekiya@chem.kyushu-univ.jp)

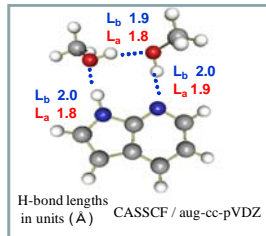
【専門】 クラスタ化学、光化学

【キーワード】 レーザー分光、クラスタ、励起状態ダイナミクス

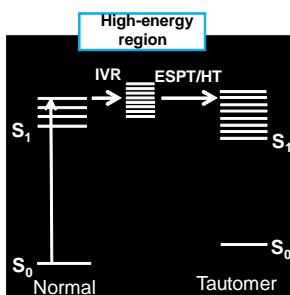
【計画研究課題名】 分子クラスタ内プロトン・電荷移動—凝縮相との違いは何に起因するか

〈研究グループアクティビティ〉

- ・ 励起状態多重プロトン移動 (PT)  
水素結合クラスタ内で複数のプロトンが移動する場合の機構を解明

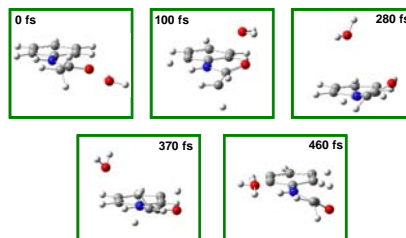


$L_a$  は  $L_b$  より強く水素結合するので、PT が起こり易い



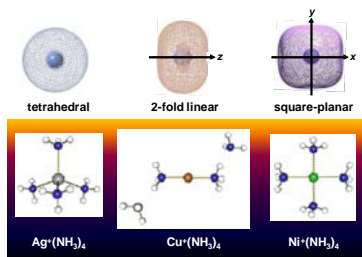
PT 機構はクラスタの内部エネルギーに依存

- ・ クラスタ内水分子の転移  
クラスタの光イオン化により水分子の転移の機構を研究



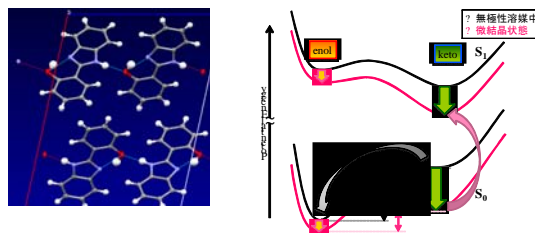
MD シミュレーションからは水分子が約 500fs で転移

- ・ 金属・溶媒和クラスタ  
赤外光解離分光で金属・溶媒和クラスタの配位構造を研究



金属イオンの d-電子の配置に溶媒和構造が強く依存

- ・ 結晶状態のプロトン・電荷移動  
強い分子間相互作用による特異な分子構造と反応について研究



結晶状態ではプロトン移動ポテンシャルが大きく変化